제2장 양자역학의 체계

2.1 입자성과 파동묶음

만약 입자가 파동으로 표현된다면 입자의 위치를 파동의 관점에서는 어떻게 파악할 수 있을까? 우리는 여러 가지 파동들을 합하면, 어떤 영역에서는 합해서 커지고, 다른 영역에서는 상쇄되어 파동이 작아진다는 것을 알고 있다. 그렇다면, 특정한 영역에서만 파동이 존재하고 나머지 영역에서는 파동이 모두 상쇄되는 그러한 파동묶음(wave packet)을 생각하면 우리는 그것이 어떠한 입자를 표현한다고 생각할 수 있을 것이며, 파동이 존재하는 영역을 입자의 존재영역으로 생각할 수 있을 것이다. 파동묶음은 수학적으로 푸리에 급수전개(Fourier series expansion)로 표현할 수 있는데 이에 대해서도 살펴보기로 하자.

• 국소적 파동묶음과 파동의 전파

파동의 속도로는 두 가지를 생각할 수 있는데, 동일한 위상이 전파되는 속도인 위상속도(phase velocity)와 파동이 묶음으로 변조(modulation)되어 전파되는 속도인 군속도(group velocity)를 들 수 있다.

예컨대 파동이 $\psi(x,t) = A\cos(kx - wt)$로 주어졌을 때, 위상속도 v_{ph}는 시간에 의한 변화와 공간에 의한 변화가 동일하여 위상에 변화가 없는 조건식 $kdx - wdt = 0$으로부터 $v_{ph} = \frac{dx}{dt} = \frac{w}{k}$ 로 주어진다.

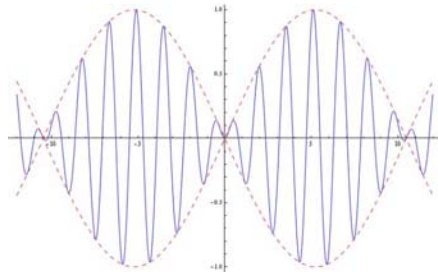
이제 비슷한 두 파동이 다음과 같이 합하여진 파동을 생각하여 보자.

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= A\cos(w_1 t - k_1 t) + A\cos(w_2 t - k_2 x) \\ &= 2A\cos\left(\frac{(w_1+w_2)t - (k_1+k_2)x}{2}\right)\cos\left(\frac{(w_1-w_2)t-(k_1-k_2)x}{2}\right)\end{aligned}$$

이제는 전체 파동이 동일한 위상을 유지하려면 각 파동의 위상변화의 차이가 같아야 된다.

즉, $\delta\phi_1 - \delta\phi_2 = (w_1 dt - k_1 dx) - (w_2 dt - k_2 dx) = (w_1 - w_2)dt - (k_1 - k_2)dx = 0$ 에서 파동의 변조가 전파되어 가는 군속도는 $v_{gp} = \frac{w_1 - w_2}{k_1 - k_2} \left(= \frac{\triangle w}{\triangle k}\right)$로 주어진다.

위 예에서 합해진 파동의 위상속도는 $v_{ph} = \frac{w_1 + w_2}{k_1 + k_2}$ 로 주어지며 이는 아래 [그림2.1]에 표시되어 있다.



[그림2.1] 비슷한 두 파동의 합성

일반적으로 여러 파동을 합성하여 국소적 파동묶음을 형성하면, 각진동수(w)는 파수(k)의 함수로 주어지는데, 이러한 각진동수와 파수 사이의 관계를 우리는 분산관계(dispersion relation)라고 한다. 예컨대 $\frac{w}{k}=$ 상수로 값이 주어지면 파동은 흩어지지 않는다. 그러나 이 값이 파장이나 진동수의 함수로 주어진다면 파동은 분산되게 된다. 예컨대, 파장에 의존하게 되면, 유리등의 매질을 통과할 때 파장에 따라 빛이 나누어서(색깔별로) 분산되게 된다. 한편 일반적으로 파동묶음은 단순파동들의 푸리에 합성으로 표현할 수 있다.
특정한 값 k에 대한 단조화 파동을 복소함수 $\psi(x,t)=Aexp[i(kx-w_k t)]$ 로 표현하면, 파동묶음은 푸리에 급수전개 방식을 사용하여 일반적으로 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\Psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}dk\,g(k)\exp[i(kx-w(k)t)]$$

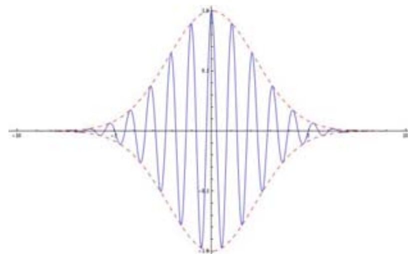
여기서 가우스 형태의 파형을 가정하면, $g(k)=\exp[-a(k-k_0)^2]$로 표현할 수 있는데, $w(k)=w(k_0)+(k-k_0)\left(\frac{dw}{dk}\right)_{k_0}+\frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2w}{dk^2}\right)_{k_0}+\cdots$ 로 급수 전개한 후,

$w_0\equiv w(k_0)$, $\left(\frac{dw}{dk}\right)_{k_0}\equiv v_{gp}$, $\left(\frac{d^2w}{dk^2}\right)_{k_0}\equiv b$ 로 놓고, $k-k_0\equiv k'$ 로 놓으면 $\Psi(x,t)$는 k' 의 이차항까지만 근사할 경우 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\Psi(x,t)=\exp[i(k_0x-w_0t)]\int_{-\infty}^{\infty}dk'\exp[-(a+\frac{ibt}{2})k'^2]\exp[ik'(x-v_{gp}t)]$$

$$=\sqrt{\frac{\pi}{a+ibt/2}}\exp[i(k_0x-w_0t)]\exp[-(x-v_{gp}t)^2/4(a+\frac{ibt}{2})]$$

여기서 우리는 $\int_{-\infty}^{\infty}dk\exp[-ak^2]=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ 의 적분결과를 이용하였다. 다시, 복소수 z를 지수로 갖는 $e^z=e^{(Re\,z+i\,Im\,z)}$ 의 절대값이 $e^{Re\,z}$ 임을 사용하면 위 전체파동의 절대값은 $\left(\frac{\pi^2}{a^2+(bt/2)^2}\right)^{\frac{1}{4}}\exp[-a(x-v_{gp}t)^2/4(a^2+(bt/2)^2)]$ 로 주어져서, 파동묶음이 점점 퍼지면서 v_{gp} 의 속도로 전파되어 나가는 것을 알 수 있다.
특정한 시간에 위의 가우스 파형의 파동묶음을 본다면 아래 [그림2.2]와 비슷할 것이다.



[그림2.2] 가우스 파형의 파동묶음

• **파동묶음과 슈뢰딩거 방정식**

이제 위의 파동묶음의 표현을 드브로이의 파동과 운동량 사이의 관계식 $p=\hbar k$ 를 쓰고, 에너지를 각진동수 w 를 써서 $E=\hbar w$ 로 표시하면 다음과 같이 쓸 수 있을 것이다.

$$\Psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty} dp\,\phi(p)\exp[i(px-Et)/\hbar]$$

함수 Ψ 를 시간 t 에 대하여 1차 미분하고 $i\hbar$ 를 곱해주면 우리는 다음과 같이 됨을 알 수 있다.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\int dp\;\phi(p)E\exp[i(px-Et)/\hbar]$$

여기서 자유입자의 경우 $E=\frac{p^2}{2m}$ 의 관계를 사용하면 위식의 우변은 x에 대하여 2차 미분하고 $-\frac{\hbar^2}{2m}$ 의 상수를 곱한 것과 같음을 알 수 있다. 그러므로 우리는 다음의 관계식을 얻는다.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

이는 곧 자유입자에 대한 슈뢰딩거 방정식이다. 위에서 에너지를 위치에너지를 포함하여 $E=\frac{p^2}{2m}+V(x)$ 로 표시한다면, 우리는 일반적인 슈뢰딩거 방정식을 얻을 수 있다.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V(x)\Psi$$

Copyright © 2009 한누리